

MODELO J1-J2: ENERGIA, CORRELACIONES Y FLUCTUACIONES DE PARAMETROS DE ORDEN EN REDES FINITAS

H. A. Ceccatto, C. J. Gazza y A. E. Trumper

Instituto de Física Rosario, Universidad Nacional de Rosario y CONICET,

Bv. 27 de Febrero 210Bis, 2000 Rosario.

Una teoría de ondas de spin modificada se aplica al estudio de antiferromagnetos cuánticos frustrados en redes cuadradas finitas. Los resultados para energía y funciones de correlación concuerdan muy bien con valores exactos obtenidos por métodos numéricos. Se estudian además las fluctuaciones de distintos parámetros de orden propuestos para caracterizar nuevas fases de origen puramente cuántico. Los resultados obtenidos sugieren que la evidencia numérica en favor de órdenes de largo alcance tipo "dimer" y "twist" no es significativa, debiéndose sólo al tamaño finito de las redes consideradas.

Recientemente se ha sugerido¹ que los planos Cu-O en compuestos superconductores de alta T_c levemente dopados pueden ser descritos por un modelo de Heisenberg frustrado:

$$H = J_1 \sum_{i,\delta} S_i \cdot S_{i+\delta} + J_2 \sum_{i,\delta'} S_i \cdot S_{i+\delta'} \quad (1)$$

donde δ' son las diagonales de las plaquetas en la red cuadrada. Clásicamente, el estado fundamental de este modelo posee dos fases diferenciadas a) orden antiferromagnético para $J_2/J_1 < 1/2$ y b) dos subredes de Néel interpenetradas independientes para $J_2/J_1 > 1/2$. Precisamente para $J_2/J_1 = 1/2$ varios estados clásicos resultan degenerados, sugiriendo que cerca de este punto las fluctuaciones cuánticas podrían estabilizar una nueva fase de origen puramente cuántico. En esta comunicación investigamos las propiedades del modelo definido en (1) mediante una teoría de ondas de spin modificada recientemente propuesta por Takahashi². Básicamente dicha teoría incorpora a la teoría convencional la restricción de magnetización nula para sistemas de baja dimensionalidad a $T > 0$ (Teorema de Mermin-Wagner), o para sistemas finitos a $T \geq 0$. Tal restricción se introduce a través de un multiplicador indeterminado mediante el reemplazo

$$H \rightarrow H + \lambda \sum_i (-1)^i S_i^z \quad (2)$$

donde $(-1)^i = 1(-1)$ para spines apuntando hacia arriba (abajo) en el estado fundamental clásico. El reemplazo de los operadores de spin en (2) por operadores bosónicos mediante la transformación

de Dyson-Maleev produce un Hamiltoniano con términos cuárticos. Un desacople tipo Hartree-Fock de dichos términos, seguido de la correspondiente diagonalización del Hamiltoniano cuadrático así obtenido, produjo los resultados que se muestran en las figuras (1)-(3). En la Fig. (1) se grafica la energía en función de la frustración introducida en el modelo para redes de $N = 16, 20$ sitios, y para la red infinita (línea de trazos). Los resultados correspondientes a redes finitas concuerdan muy bien con resultados numéricos obtenidos por diagonalización exacta³.

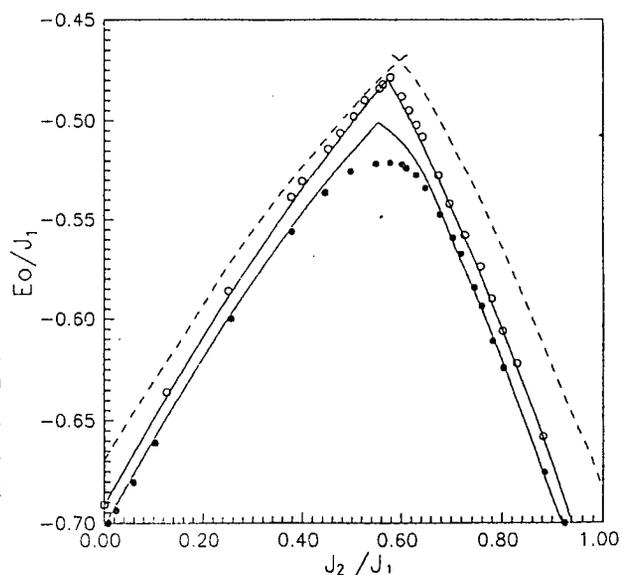


Figura 1: Energía del estado fundamental por unión para $N=16$ (línea llena inferior), $N=20$ (línea llena superior) y $N=\infty$ (línea de trazos). También se muestran los resultados exactos para $N=16$ (puntos vacíos) y $N=20$ (puntos llenos) tomados de ref. 3.

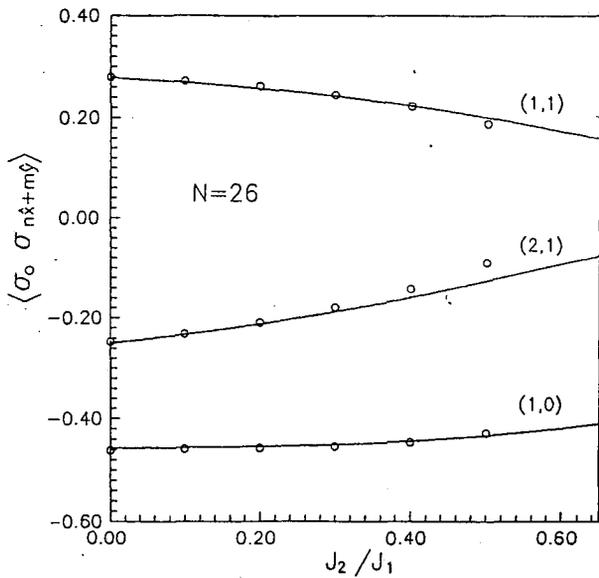


Figura 2: Funciones de correlación $\langle \sigma_0 \sigma_r \rangle \equiv 4/3 \langle S_0 \cdot S_r \rangle$ con $r=nx+my$ para la red de 26 sitios. Los puntos son valores exactos tomados de Ref. 4.

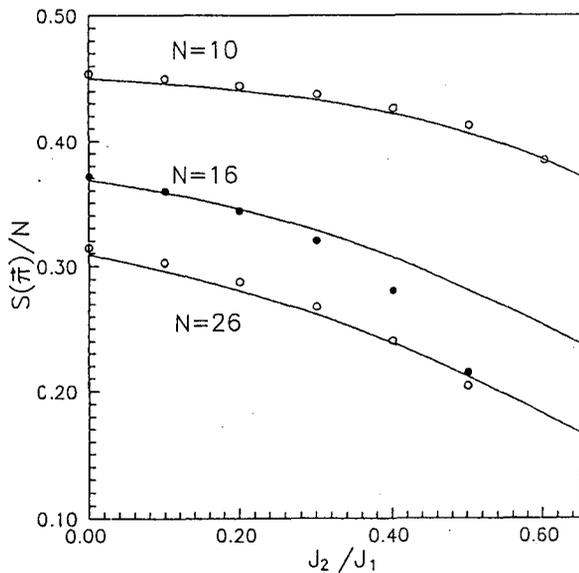


Figura 3: Factor de estructura por sitio promedio rotacionalmente para redes de diferentes tamaños. Los puntos son valores exactos tomados de Ref. 4.

Para la red infinita las fluctuaciones cuánticas renormalizan el punto de transición entre las dos fases arriba mencionadas, llevándolo aproximadamente a $J_2/J_1=0.6$. La discrepancia con los resultados exactos cerca del punto de transición para $N=16$ se debe a que para dicha red no hay cruce de niveles de energía al ir de una fase a la otra³. La figura (2) muestra las correlaciones de un spin en el origen con distintos spines vecinos para $N=26$ y en la región correspondiente a la fase de

Néel. Finalmente la Fig. (3) muestra el factor de estructura para un vector de onda $Q=(\pi,\pi)$ y para distintos tamaños de redes. Nuevamente los resultados obtenidos concuerdan muy bien con resultados numéricos exactos⁴, excepto para $N=16$. Dicha red presenta un comportamiento no-sistemático debido a degeneraciones originadas en simetrías adicionales que posee. A fin de establecer si la aproximación usada es capaz de reproducir detalles más sutiles del modelo -tales como la existencia de fases no-magnéticas cerca la región de transición $J_2/J_1=0.6$ - hemos también evaluado correlaciones de cuatro spines. El cálculo involucra aparear varios productos de ocho operadores bosónicos, lo que produce largas expresiones con algunas decenas de términos. El conocimiento de las funciones de correlación de cuatro spines permite estudiar las fluctuaciones de distintos parámetros de orden propuestos para caracterizar las posibles fases no-magnéticas arriba mencionadas.

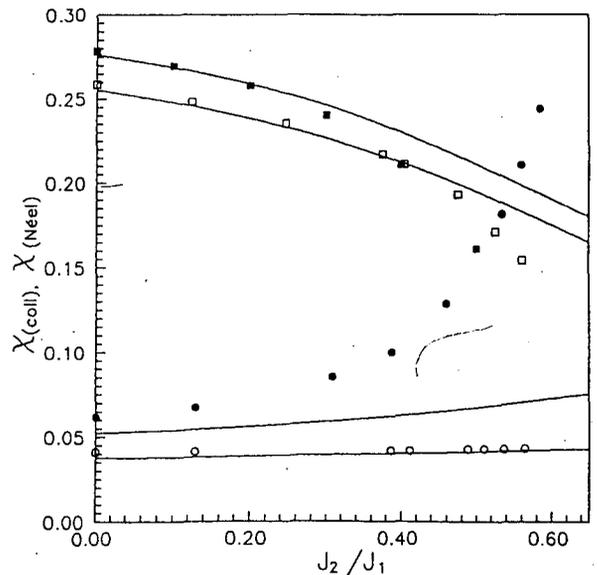


Figura 4: Susceptibilidad del parámetro de orden asociado a la fase "dimer". Los puntos abiertos (sólidos) son resultados exactos para redes de $N=16(20)$ tomados de Ref. 3.

En particular hemos considerado los parámetros de orden asociados a fases tipo "dimer"⁵ y "twist"⁶. En la Fig. (4) se muestran los resultados obtenidos para la susceptibilidad del parámetro de orden correspondiente a la fase "dimer" para $N=16, 20$, junto con los valores numéricos exactos³. Puede observarse un pequeño incremento en las fluctuaciones cerca de $J_2/J_1=0.6$, lo que indicaría la posibilidad de la aparición de dicha fase en la

región de transición. Sin embargo tal comportamiento desaparece incrementando el tamaño de la red (para $N \rightarrow \infty$ la curva se achata y aproxima a cero). Si bien en este caso los resultados no son cuantitativamente correctos -lo cual no es de extrañar ya que correlaciones de cuatro cuerpos en general no son correctamente descritas por aproximaciones tipo Hartree-Fock- los comportamientos cualitativos coinciden con los observados numéricamente. En el caso de la susceptibilidad del parámetro de orden asociado a la fase "twist", numéricamente se observa³ un incremento en las fluctuaciones que se hace más pronunciado al ir de $N=16$ a $N=20$, lo cual indicaría que este tipo de fase podría estabilizarse en el límite de red infinita. Nuestros resultados indican el mismo comportamiento para tales tamaños de redes, aunque para redes mayores la susceptibilidad comienza a disminuir gradualmente convergiendo nuevamente a cero para la red infinita. En consecuencia, si se acepta la validez de nuestra teoría al menos en la predicción cualitativa de los comportamientos indicados, los resultados obtenidos indican que ninguna de las dos fases no-magnéticas consideradas aparecerían en el diagrama de fases del estado fundamental de (1).

REFERENCIAS

- 1) M.Inui, S.Doniach, and M.Gabay, Phys. Rev. B38, 6631 (1988)
- 2) M.Takahashi, Phys. Rev. Lett. 58, 168 (1987); Phys. Rev. B40, 2494 (1989)
- 3) E.Dagotto and A.Moreo, Phys. Rev. Lett. 63, 2148 (1989)
- 4) J.E.Hirsch and Sanyee Tang, Phys. Rev. B39, 2887 (1989)
- 5) N.Read and S.Sachdev, Phys. Rev. Lett. 62, 1694 (1989)
- 6) P.Chandra, P.Coleman, and A.Larkin, Phys. Rev. Lett. 64, 88 (1990); J. Phys.: Condens. Matter 2, 7933 (1990)

CEILAP
CITEFA - CONICET
ZUFRIATEGUI Y VARELA
1603 VILLA MARTELLI
REPUBLICA ARGENTINA